

А.М. Швайка, О.Я. Фаренюк

Інститут фізики конденсованих систем НАН України

ВПЛИВ ТУНЕЛЬНОГО РОЗЩЕПЛЕННЯ РІВНІВ НА ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННОЇ МОДЕЛІ

Мікроскопічна природа багатьох ефектів в сполуках з перехідними та рідкоземельними елементами пов'язана з сильними електронними кореляціями, як локальними так і нелокальними, включаючи корельований перенос. Вплив корельованого переносу вважається суттєвим при поясненні електрон-діркової асиметрії, переходу метал-діелектрик при зміні температури, виникненні феромагнітного стану і високотемпературної надпровідності. Для розгляду електронних кореляцій часто використовується модель Габбарда, доповнена врахуванням особливостей електронних станів чи динаміки ґратки. Одним з таких узагальнень є псевдоспін-електронна модель (ПЕМ) з тунельним розщепленням рівнів.

Для ПЕМ тунельне розщеплення рівнів приводить до того, що після діагоналізації одновузлової частини і переходу до операторів Габбарда інтеграл переносу залежить від станів відповідних вузлів, тобто зводиться до моделі з корельованим переносом. Дослідження цієї моделі проводилося з використанням узагальненого методу динамічного середнього поля для систем з корельованим переносом [1].

В даній роботі ПЕМ з тунельним розщепленням рівнів розглядається в наближенні типу сплаву. Показано, що для корельованого переносу, спричиненого тунелюванням існує проста схема переходу від матричної до скалярної і навпаки форм запису рівнянь. Розраховано енергетичний спектр моделі. Досліджено залежність концентрації електронів та середнього значення псевдоспінів від хімічного потенціалу і параметру асиметрії, а також вплив тунелювання.

1. Shvaika A.M. Dynamical mean-field theory of correlated hopping: a rigorous local approach //Phys. Rev. B, 2003, Vol.67, 075101